УДК 519.6 DOI: https://doi.org/10.15407/jai2020.04.060

О.М. Хіміч, Т.В. Чистякова, В.А. Сидорук, П.С. Єршов
Інститут кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України, Україна
пр. Академіка Глушкова, 40, м. Київ, 03187

ІНТЕЛЕКТУАЛЬНА СИСТЕМА КОМП'ЮТЕРНОЇ МАТЕМАТИКИ INPARSOLVER

A.N. Khimich, T.V. Chistyakova, V.A. Sydoruk, P.S. Yershov
V.M. Glushkov Institute of Cybernetics, NAS of Ukraine, Ukraine
40, Akademika Glushkova Ave., Kyiv, 03187

INTELLECTUAL COMPUTER MATHEMATICS SYSTEM INPARSOLVER

Анотація. У роботі розглядається інтелектуальна система комп'ютерної математики InparSolver, яка призначена для автоматичного дослідження та розв'язування основних класів задач обчислювальної математики на багатоядерних комп'ютерах з графічними прискорювачами. Окреслено проблеми достовірності результатів розв'язання задач із наближеними даними. Проаналізовано особливості використання існуючих систем комп'ютерної математики, виявлено їх недоліки. Описуються функціональні можливості InparSolver, деякі інноваційні підходи щодо реалізації ефективного розв'язування задач на гібридній архітектурі. Наведено приклади застосування InparSolver у математичному моделюванні процесів у різних предметних областях. У наш час, у багатьох предметних областях (ядерна енергетика, механіка, хімія, молекулярна біологія, медицина тощо) постійно виникають нові, більш складні об'єкти та явища, що підлягають математичному дослідженню на комп'ютері. Це спонукає до розробки нових чисельних методів та технологій математичного моделювання, а також до створення більш потужних комп'ютерів для їх реалізації. Із появою та постійним розвиненням суперкомп'ютерів різної архітектури, дуже великої актуальності набувають проблеми їх ефективного використання, розширення кола задач, які необхідно розв'язувати, забезпечення достовірності комп'ютерних результатів та підвищення рівня інтелектуальної інформаційної підтримки користувачів – фахівців у різних предметних областях. Питанням вирішення цих проблем приділяється на сьогодні особлива увага багатьох спеціалістів у галузях інформаційних технологій та паралельного програмування. Найвидатніші в світі вчені в галузі комп'ютерних технологій вирішення проблем ефективного використання сучасних суперкомп'ютерів вбачають у створенні алгоритмічно-програмного забезпечення, яке легко адаптується до різних комп'ютерних архітектур з різними видами пам'яті та співпроцесорами, підтримує ефективний паралелізм на мільйонах ядер тощо. Крім того, підвищення ефективності реалізації високопродуктивних обчислень на сучасних суперкомп'ютерах передбачається шляхом їх інтелектуалізації, передаючи комп'ютеру для самостійного виконання значну частину функцій (символьні мови для комп'ютерної постановки задачі, дослідження властивостей математичних моделей, візуалізація та аналіз результатів розв'язування задач тощо). Індустрія розробки та використання інтелектуальних комп'ютерних технологій є одним із основних напрямків розвитку науки та технологій у сучасному суспільстві.

Ключові слова: інтелектуальна система комп'ютерної математики; математичне моделювання; наближені дані; засоби штучного інтелекту.

Abstract. The paper considers the intellectual computer mathematics system InparSolver, which is designed to automatically explore and solve basic classes of computational mathematics problems on multi-core computers with graphics accelerators. The problems of results reliability of solving problems with approximate input data are outlined. The features of the use of existing computer mathematics systems are analyzed, their weaknesses are found. The functionality of InparSolver, some innovative approaches to the implementation of effective solutions to problems in a hybrid architecture are described. Examples of applied usage of InparSolver for processes mathematical modeling in various subject areas are given. Nowadays, new more complex objects and phenomena in many subject areas (nuclear energy, mechanics, chemistry, molecular biology, medicine, etc.) are constantly emerging, which are subject to mathematical research on a computer. This encourages the development of new numerical methods and technologies of mathematical modeling, as well as the creation of more powerful computers for their implementation. With the advent and constant development of supercomputers of various architectures, the problems of their effective use, expansion of tasks range should be solved, ensuring the reliability of computer results and increasing the level of intellectual information support for users – specialists in various fields. Today, the issues of solving these problems are given special attention by many specialists in the fields of information technology and parallel programming. The world's leading

scientists in the field of computer technology see the solution to the problems of efficient usage of modern supercomputers in algorithmic software creation that easily adapts to different computer architectures with different types of memory and coprocessors, supports efficient parallelism on millions of cores etc. In addition, improving the efficiency of high-performance computing on modern supercomputers is provided by their intellectualization, transferring to the computer to perform a significant part of the functions (symbolic languages for computer problem statement, research of mathematical models properties, visualization and analysis of tasks results, etc.). The industry of development and usage of intelligent computer technologies is one of the main directions of science and technology development in modern society.

Keywords: intelligent system of computer mathematics; mathematical modeling; approximate data; artificial intelligence tools.

Вступ

Одним з перспективних шляхів використання високопродуктивних комп'ютерів при математичному моделюванні процесів з великими обсягами даних в науці та інженерії на сьогоднішній день є використання комп'ютерів гібридної архітектури, яке поєднує MIMD-архітектуру (багатопроцесорні, багатоядерні CPU) та комп'ютери із SIMD-архітектурою графічних прискорювачів (GPU), – гібридні комп'ютери. Проте, при використанні цих комп'ютерів у математичному моделюванні виникають проблеми ефективного використання двох різних комп'ютерних архітектур.

Як відмічають багато спеціалістів, досить великий набір існуючого програмного забезпечення для математичного моделювання, як правило не враховує похибки вихідних даних розв'язуваної задачі [1–11]. Проте, математичні моделі фізичних процесів, які описуються диференціальними та інтегральними рівняннями або варіаційними задачами, можуть мати природні заокруглення в результаті вимірювань, спостережень, припущень, гіпотез і т. п. У цьому випадку вихідні дані є деяким наближенням до точних даних задачі.

Надалі, при дискретизації математичної моделі, ці похибки трансформуються у похибки коефіцієнтів рівнянь, які підлягають розв'язуванню. Крім того, вихідні дані математичних моделей можуть бути задані точно в числовому вигляді або представлені математичними формулами, але заокруглення при введенні чисел в комп'ютер та обчислення формул також призводить до комп'ютерних моделей з наближеними даними [8, 10, 12, 13].

Проблеми достовірності комп'ютерних результатів розв'язування задач з наближеними даними можуть бути вирішені в тому випадку, якщо в комп'ютерному середовищі дослідити математичні властивості комп'ютерної моделі задачі та розв'язати алгоритмом у відповідності до цих властивостей з аналізом достовірності отриманих результатів, враховуючи архітектурні та технологічні особливості комп'ютера [10].

Самостійне вирішення вказаних проблем математичного моделювання на гібридних комп'ютерах вимагає від користувачів-спеціалістів з різних предметних областей відповідних знань в області обчислювальної математики, архітектурних особливостей комп'ютерів, навиків використання різних технологій паралельного програмування і т. д.

У Інституті кібернетики імені В. М. Глушкова НАН України створено інтелектуальну систему комп'ютерної математики (ІСКМ) InparSolver для автоматичного виконання на гібридних комп'ютерах дослідження та розв'язування (з гарантією достовірності результатів) задач обчислювальної математики з наближеними даними, які виникають при математичному моделюванні складних процесів та явищ у наукових та інженерних дослідженнях, а саме: системи лінійних алгебраїчних рівнянь, алгебраїчна проблема власних значень, системи нелінійних рівнянь, задачі Коші для систем звичайних диференціальних рівнянь з наближеними даними. При цьому автоматично виконується розпаралелення обчислень та даних при ефективному використанні обчислювальних ресурсів гібридного комп'ютера. Інтелектуальний інтерфейс надає можливість вводити дані задачі на мові предметної області та отримувати результати роз-

в'язування з детальним поясненням процесу дослідження задачі. Таким чином, InparSolver забезпечує роботу користувача на комп'ютері зі складною гібридною архітектурою як на комп'ютері однопроцесорної архітектури.

Тут ми будемо розглядати універсальні функціональні можливості InparSolver на класі задач – системи лінійних алгебраїчних рівнянь (СЛАР).

Аналіз проблем використання існуючих систем комп'ютерної математики

У наш час велика увага приділяється розробці та використанню систем комп'ютерної математики (СКМ). Це поняття включає сукупність як теоретичних та технологічних засобів, так і сучасних програмних й апаратних засобів, що надають можливість: формулювати завдання за допомогою спеціальної символьної мови в термінах математики; автоматизувати виконання як чисельних, так і аналітичних обчислень; розробляти складні обчислювальні алгоритми для розв'язування задач; застосовувати засоби візуалізації процесів та даних тощо [14].

Найбільшу популярність мають такі СКМ: MathCAD, Maple, Mathematica, Matlab. Ці програмні засоби найчастіше використовуються для розв'язання навчальних, інженерних, науково-дослідних задач у різних галузях природничих наук. Серед недоліків цих СКМ користувачі відмічають, що реалізація чисельних алгоритмів (наприклад, розв'язування нелінійних або диференціальних рівнянь) в них базується на точно заданих даних [11, 15]. Тому є випадки отримання неправильних результатів розв'язування, не надається інформація, яким методом розв'язувалася задача. Документація для користувачів досить велика (наприклад, обсяг документації Matlab досягає майже 5 тис. сторінок, що робить її важко доступною для огляду). Специфічні редактори коду програм також ускладнюють роботу з СКМ.

За десятиріччя використання комп'ютерів для розв'язування широкого кола різноманітних прикладних задач створено велику кількість проблемно орієнтованих програмних пакетів, наприклад, ANSYS, NASTRAN та інші. В переважній більшості ці програмні засоби призначено для однопроцесорних комп'ютерів. Для ефективного використання на суперкомп'ютерах, як відмічають спеціалісти [1, 2, 5–9], вони потребують суттєвої інтелектуалізації – створення засобів автоматичного налаштування на архітектуру комп'ютера та автоматичної побудови математичних моделей і відповідних паралельних алгоритмів їх дослідження, а також розробки інтерфейсів для спілкування з користувачами на мові предметної області.

Таким чином, створення ІСКМ з функціями автоматичного дослідження та розв'язування задач обчислювальної математики та гарантією достовірності результатів є актуальною роботою.

Гібридні алгоритми для дослідження та розв'язування СЛАР в InparSolver

Для дослідження й розв'язування лінійних систем на гібридних комп'ютерах створено низку нових паралельних алгоритмів відомих прямих методів для щільних та розріджених матриць різної структури на основі LU, LL^T та *SVD*-розвинень матриць [10, 16, 17]. Також представлено нові гібридні алгоритми та програми ітераційних методів розв'язування СЛАР з розрідженими матрицями нерегулярної структури та наближеними даними на основі методу верхньої релаксації, поперемінно трикутного методу тощо [18, 19].

Із метою підвищення ефективності розв'язування задач лінійної алгебри для розріджених матриць нерегулярної структури великих розмірів використано ідею попереднього їх зведення за допомогою методу паралельних перерізів до блочно діагональної матриці з обрамленням [17]. Таке представлення розрідженої матриці дає можливість зменшувати обсяг даних задач та більш ефективно виконувати розпаралелення обчислень як на CPU, так і на GPU.

Кожен гібридний алгоритм здійснює дослідження його відповідності математичним властивостям СЛАР з наближеними

даними, які виявляються в комп'ютері, та розв'язування на ефективній топології комп'ютера з оптимальної кількості процесорів CPU та відповідних GPU. Процесори GPU, здебільшого, використовуються для багатопоточного виконання матрично-матричних та матрично-векторних операцій при асинхронному копіюванні необхідних даних великих обсягів між CPU та GPU.

У разі необхідності уточнення результатів розв'язування, процес обчислень автоматично виконується з підвищеною комп'ютерною розрядністю. По закінченню обчислювального процесу видається розв'язок задачі з оцінками точності або пояснення причини неможливості отримати розв'язок.

Одна із важливих проблем, яка виникає при розв'язанні практичних задач з розрідженими матрицями апріорі не визначеної структури, полягає у виборі ефективного алгоритму. У ІСКМ для задач з розрідженими матрицями великих обсягів реалізовано за допомогою методів штучних нейронних мереж автоматичне розпізнавання структури матриць та вибір найефективнішого гібридного алгоритму розв'язування за такою схемою [20]:

- візуалізація матриці на основі класифікації об'єктів;
- визначення типу («портрету») матриці;
- визначення необхідного алгоритму розв'язування для типу матриці;
- дослідження та розв'язання задачі відповідним гібридним алгоритмом.

Такий підхід до створення гібридних алгоритмів забезпечує його масштабованість, ефективне використання обчислювальних ресурсів та часу розв'язування, гарантує достовірність результатів розв'язування.

Комп'ютерне дослідження математичних властивостей СЛАР з наближеними даними

Коротко опишемо методологію комп'ютерного дослідження математичних властивостей СЛАР з наближеними даними в InparSolver [8, 10].

Розв'язування сумісних СЛАР

$$Ax = b \qquad (1),$$

де, в загальному випадку, A – прямокутна матриця розміру $m \times n$; b – матриця правої частини розміру $m \times q$ (m-мірний вектор), зводиться до знаходження такого розв'язку x (матриці розміру $n \times q$, n-мірного вектора), щоб рівняння (1) перетворювалося в тотожність. Відомо, якщо матриця A системи квадратна, невироджена, (тобто її визначник $|A| \equiv \det(A) \neq 0$), то розв'язок СЛАР (1) існує й єдиний.

Несумісні системи класичного розв'язку не мають, проте, в цьому випадку, можна знайти такий розв'язок x, який мінімізує евклідову норму $\|Ax - b\|$. Вектор x називається розв'язком за методом найменших квадратів або узагальненим розв'язком СЛАР. У загальному випадку існує нескінченна множина узагальнених розв'язків. Розв'язок, який має найменшу норму $\|x\|$, єдиний і називається нормальним узагальненим розв'язком або нормальним псевдорозв'язком. Іноді ставиться задача визначення стійкої проєкції на підпростір, утворений сингулярними векторами матриці A.

Як вже зазначалося, при розв'язуванні прикладних задач рідко виникають СЛАР з точними даними

$$\bar{A}\bar{x} = \bar{b} \,. \qquad (2)$$

Найбільш типова є постановка задачі (1) разом із заданням відповідних похибок у вихідних даних:

$$\begin{aligned} \|\bar{A} - A\| &= \|\Delta A\| \le \varepsilon_A \|\bar{A}\| \\ \|\bar{b} - b\| &= \|\Delta b\| \le \varepsilon_b \|\bar{b}\| \end{aligned} \qquad (3)$$

При цьому передбачається, що структура матриці вихідної задачі (2) та збуреної задачі (1), (3) не змінюється, тобто, якщо вихідна матриця є симетрична, то й збурена залишається також симетричною, якщо вихідна – стрічкова, то й збурена – стрічкова, і т. д.

Тут ми розглядаємо випадок, коли A – квадратна матриця розміру $n \times n$; b – вектор правої частини СЛАР розміру

n; x – розв'язок (вектор розміру n); ε_A, ε_b – максимальні відносні похибки елементів матриці і правої частини.

Розв'язуючи СЛАР із наближеними даними, необхідно розглядати цілий клас систем рівнянь (1), (3), що має досить широку множину формально допустимих розв'язків. Тому, розв'язавши задачу (1), необхідно оцінити збурення розв'язку, в залежності від збурення вихідних даних (3). Не завжди схожість елементів матриць $\overline{A}$ і $\overline{A}$ та правих частин b і $\overline{b}$ забезпечує достатню схожість розв'язків. Наприклад, при деякому збуренні в межах точності задання елементів матриці і/або правої частини несумісної, точно заданої системи (2), отримана в комп'ютері збурена система (1), (3) може виявитися сумісною й навпаки – сумісна СЛАР може перетворитися в несумісну [10].

У першу чергу, комп'ютерне дослідження СЛАР з наближеними даними визначає існування та єдиність класичного розв'язку, сумісність системи. Крім того, досліджується коректність постановки задачі (1), (3), виродженість і/або додатно означеність матриці системи в межах похибки вихідних даних дослідження СЛАР з наближеними даними. Невиродженою в межах точності задання вихідних даних вважається матриця, яка не може стати виродженою в області ΔA зміни числових значень її елементів з умови (3).

Машинно невиродженою вважається матриця, яка не може стати виродженою при зміні числових значень її елементів у межах машинної точності.

Теоретичним критерієм коректності СЛАР (1), (3) з квадратною матрицею та з наближеними вихідними даними є виконання умов:

$$\det(A) \neq 0, \qquad \|\Delta A\| \left\|A^{-1}\right\| < 1$$

для довільного збурення ΔA в межах за (3), які гарантують існування, єдиність та стійкість класичного розв'язку задач в області змін вихідних даних задачі (1), (3).

Система з прямокутною матрицею апріорі вважається некоректною. Для систем з прямокутними та виродженими матрицями обчислюється нормальний узагальнений розв'язок, який, як вказувалося вище, у випадку сумісної системи співпадає із класичним розв'язком з найменшою нормою.

Комп'ютерне дослідження коректності зводиться до перевірки двох співвідношень:

$$1.0 + \gamma \neq 1.0\,, \qquad \left(\|\Delta A\| \, \|A\|\right) h(A) < 1, \quad (4)$$

де $h(A)$ – число обумовленості матриці системи, $\gamma = h^{-1}(A)$. Перша умова, яка виконується в арифметиці із плаваючою комою, означає, що матриця невироджена в межах машинної точності (машинно невироджена), а друга – що вона невироджена в межах точності задання вихідних даних.

При виконанні умов (4) розв'язок комп'ютерної задачі існує, єдиний і стійкий. Таку комп'ютерну задачу слід розглядати як коректно поставлену в межах точності введення вихідних даних. У іншому випадку, матриця системи може виявитися матрицею неповного рангу й комп'ютерну задачу (1), (3) слід розглядати як некоректно поставлену.

Таким чином, основним критерієм для визначення властивостей СЛАР з не виродженими матрицями, які впливають на достовірність розв'язку задачі, є число обумовленості $h(A)$ матриці системи.

Для обчислення числа обумовленості невироджених матриць використовується обернена матриця A^{-1}

$$h(A) = \|A\| \left\|A^{-1}\right\|. \quad (5)$$

Якщо значення $h(A)$ у формулі (5) невелике, то матриця системи називається добре обумовленою, в іншому випадку – погано обумовленою. Проте, в комп'ютерних обчисленнях критерій доброї або поганої обумовленості матриці є величиною відносною, пов'язаною з математичними можливостями конкретного комп'ютера, похибками даних задачі тощо. Одна й та сама матриця може класифікуватися для однієї довжини мантиси машинного слова як машинно добре обумовлена, а для ін-

шої – як машинно погано обумовлена.

Погана «машинна обумовленість» тісно пов'язана із математичними можливостями конкретного комп'ютера. Збільшуючи довжину машинного слова, можна одержати комп'ютерний розв'язок, який буде досить близьким до математичного розв'язку задачі.

Обчислення оберненої матриці потребує великих витрат часу та пам'яті комп'ютера, тому в InparSolver для дослідження достовірності отримуваних розв'язків СЛАР з невиродженими матрицями використовується оцінка числа обумовленості, позначимо як cond*A*, яка обчислюється значно простіше [10].

Якщо значення cond*A* в комп'ютері із плаваючою комою задовольняє умові:

$$1.0 + 1.0/\mathrm{cond}A = 1.0, \qquad (6),$$

то матриця в InparSolver вважається виродженою в межах машинної точності й розв'язування СЛАР автоматично виконується на підвищеній розрядності, у відповідності зі значенням оцінки числа обумовленості матриці, а також обчислюються оцінки достовірності отриманого розв'язку [10].

Якщо матриця не кваліфікується за (6) як машинно вироджена, але $\varepsilon_A \times \mathrm{cond}A \geq 1$, то СЛАР з наближеними вихідними даними, яку введено в комп'ютер, вважається некоректно поставленою при даній точності елементів матриці (інакше кажучи – виродженою в межах точності задання елементів матриці). Достовірність обчисленого розв'язку не можна гарантувати.

У цьому випадку користувач отримує комп'ютерний результат розв'язування задачі з оцінками його достовірності на основній розрядності та відповідне застереження. Крім того, розв'язування СЛАР продовжується на підвищеній розрядності, у відповідності зі значенням числа обумовленості матриці. Обчислюються оцінки достовірності комп'ютерного розв'язку. Збільшуючи довжину машинного слова, у відповідності до оцінки числа обумовленості матриці, завжди можна отримати комп'ютерний розв'язок, який буде досить близьким до математичного розв'язку задачі.

Для реалізації обчислень з довільною розрядністю використано бібліотеку програм GMP (GNU Multiple-Precision Library) [21, 22]. Нижче наведено приклад дослідження СЛАР в InparSolver.

Задача. Дослідити та розв'язати за допомогою InparSolver на СКІТ-4 систему лінійних алгебраїчних рівнянь $Ax = b$, де

$$A = (a_{ij}), \ \ i, j = 1 \div n, \ \ n = 3w + 1,$$
$$w = 1, 2, ...$$
$$a_{ii} = n - i, \qquad a_{ij} = n + 1 - \max(i, j).$$

Отже, матриця системи має вигляд

$$A = \begin{pmatrix} n-1 & n-1 & n-2 & ... & 2 & 1 \\ n-1 & n-2 & n-2 & ... & 2 & 1 \\ n-2 & n-2 & n-3 & ... & 2 & 1 \\ ... & ... & ... & ... & ... & ... \\ 2 & 2 & 2 & ... & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & ... & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Елементи правої частини системи обчислюються за формулами:

$b = \{b\}_1^n$, $b_i = n - i$, якщо $i \leq 2$;

$b_i = n + 1 - i$, якщо $i > 2$.

Порядок системи $n = 1000$.

Точний розв'язок системи:

$$x = (0 \quad 1 \quad 0 \quad ... \quad 0)^T$$

Незважаючи на те, що елементи матриці та правих частин задано точно, при введенні їх в комп'ютер здійснюється заокруглення до машинної точності *macheps* [10]. Це враховується в процесі дослідження таких задач в InparSolver.

Фрагмент протоколу розв'язування задачі:

```
PROBLEM: solving of the linear algebraic
         system with a symmetic
         positive defined matrix

Process of investigating and solving

Double precision

METHOD: Choletsky decomposition

RESULTS:

THE MATRIX IS NOT POSITIVE DEFINED !!!

Number of processes: 1
```

```
METHOD: Gauss decomposition
RESULTS:
THE MATRIX IS MACHINE-SINGULAR !!!
PRECISION: 128
SOLUTION
first 4 components of solution are:
0    1    0    0
Computational error in the solution:
0.00000e+00
The vecror of solution are successfully
stored in the file result.out
Number of processes: 2
```

З протоколу видно, що, оскільки матриця системи є симетричною, то пробним алгоритмом для дослідження задачі в InparSolver вибрано алгоритм LL^T-розвинення як найбільш економічний за використанням обчислювальних ресурсів та часу виконання для таких матриць. Однак, в процесі дослідження цим алгоритмом на архітектурі 1 CPU та 1 GPU матриця виявилася недодатньо означеною й подальше дослідження задачі в InparSolver автоматично продовжено алгоритмом *LU*-розвинення.

У процесі дослідження СЛАР алгоритмом *LU*-розвинення, матриця виявилася машинновиродженою. Подальше розв'язування цим гібридним алгоритмом автоматично було продовжено на розрядності 128. Отримано очікуваний розв'язок задачі, видано 4 контрольних його значень. Причому, для ефективного дослідження СЛАР цим алгоритмом автоматично було вибрано топологію гібридного комп'ютера 2 CPU + 2 GPU. Весь вектор розв'язку збережено у файлі result.out.

Структура InparSolver

На рис. 1 представлено структуру InparSolver:

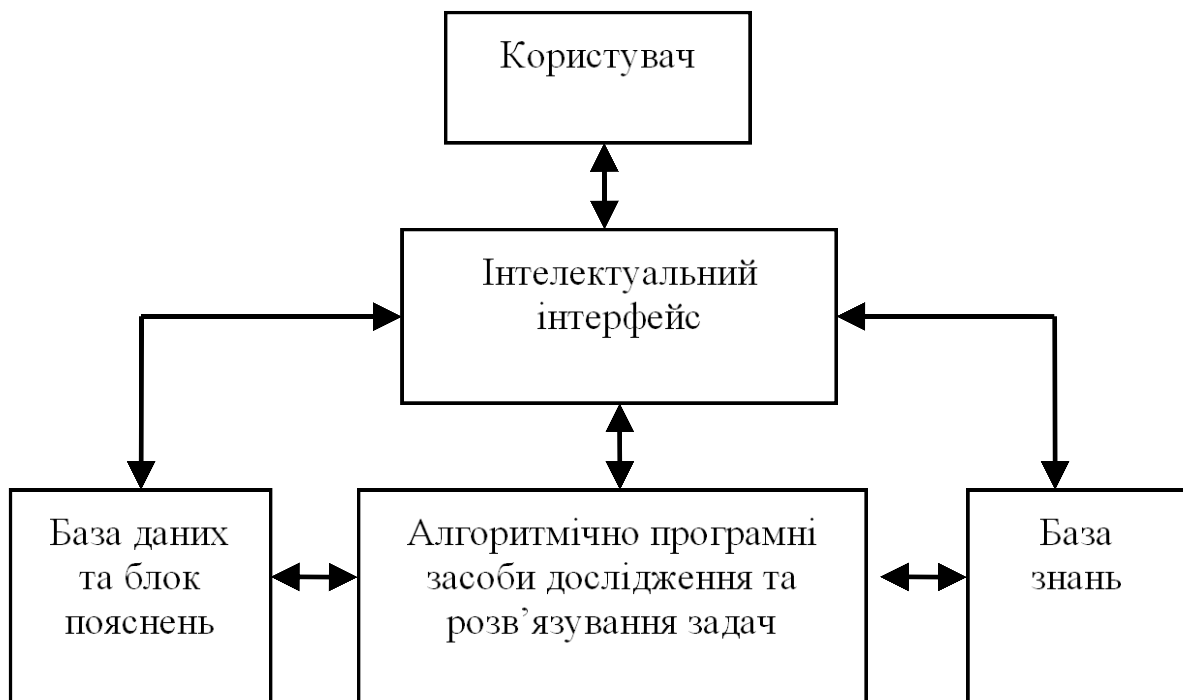


Рис. 1. Структура InparSolver

Складові частини InparSolver:

- інтелектуальний інтерфейс для спілкування з користувачами на мові предметної області;
- база знань з предметних областей, що розглядаються, на основі яких побудовано їх формальні моделі;

- база даних, до якої входять введені дані та результати досліджень задач в комп'ютері, що використовуються для адаптивного створення гібридного алгоритму та синтезу відповідної програми розв'язування;
- блок пояснень, в якому накопичується інформація про хід обчислювального процесу задачі та результати аналізу достовірності отриманих розв'язків;
- алгоритмічно-програмні засоби, за допомогою яких реалізується автоматизація всього процесу дослідження та розв'язування задачі на комп'ютері при використанні підвищеної комп'ютерної розрядності для забезпечення достовірності розв'язку задачі, а також засобів штучного інтелекту (нейронні мережі) для автоматичного розпізнання типу розріджених матриць.

З метою побудови бази знань для кожної предметної області у вигляді відповідних формальних моделей було проведено дослідження, що включає:

- визначення типів задач з урахуванням різних обчислювальних схем, різних структур даних та їх властивостей;
- встановлення параметрів для кожної задачі, достатніх для реалізації автоматичного дослідження її математичних властивостей та розв'язування;
- аналіз складу необхідних алгоритмів та програм для розв'язування визначених задач з урахуванням архітектурних та технологічних особливостей комп'ютера;
- визначення логічних зв'язків та переходів з метою реалізації автоматичного дослідження та розв'язування задач з наближеними даними;
- аналіз системних компонентів (копіляторів, процесорів CPU та GPU, оперативної пам'яті тощо), необхідних для організації обчислювального процесу на гібридному комп'ютері.

Розроблено інтелектуальний інтерфейс для спілкування користувачів з ІСКМ, який задовольняє таким вимогам:

- інтерактивна підтримка на всіх етапах розв'язування задачі без додаткової документації;
- врахування різних рівнів підготовки користувачів та їх завдань – передбачити можливість використання в автоматичному режимі дослідження та розв'язування задачі (без втручання користувача) та в інтерактивному режимі, надаючи можливість користувачам приймати участь у процесах дослідження задачі, вибору кількості процесорів тощо;
- постійний контроль та перевірка несуперечливості прийнятих рішень користувачем;
- забезпечення розв'язання задачі від початку до кінця або пояснення причин неможливості обчислювального процесу.

Діалог з користувачем забезпечує не тільки зручні способи задання даних задач, їх розв'язування та візуалізацію результатів задачі в InparSolver, але також сприяє поповненню знань з обчислювальної математики, паралельних обчислень на гібридних комп'ютерах. Із цією метою надається, за бажанням користувача, детальна інформація про технологію дослідження задач з наближеними даними та аналізу достовірності результатів, глосарій термінів з обчислювальної математики, низку прикладів задання вхідних даних.

На програмному рівні InparSolver – це сукупність програмних засобів взаємодії користувача з комп'ютером, що включає діалогові засоби, блок планування та управління обчислювальним процесом, програмні компоненти для вводу даних задач та виводу результатів тощо.

Використання InparSolver

Розроблена інтелектуальна система InparSolver функціонує на гібридному комп'ютері СКІТ-4 та може використовуватися для математичного моделювання фізико-технічних процесів локально, в Інтернет або в Українській академічній грід-системі.

Так, система InparSolver та її окремі програми, що реалізують конкретні гібридні алгоритми, були використані при математичному моделюванні процесів в'язкого руйнування товстостінних елементів трубопроводів з дефектами зношення (спільно з Інститутом електрозварювання ім. Є. О. Патона НАН України) [23]. Результати математичного моделювання надають можливість визначати залишковий ресурс відповідальних конструкцій та приймати обґрунтовані рішення щодо подовження нормативних термінів їх безпечної експлуатації. Зазначений методологічний підхід до чисельного моделювання не має світових аналогів і використовується в Інституті електрозварювання ім. Є.О. Патона НАН України для потреб атомної енергетики, а також трубопровідного транспорту України.

Також алгоритмічно-програмні засоби InparSolver було використано в математичному моделюванні задачі стійкості нових композитних матеріалів із застосуванням тривимірної моделі «волокон кінцевих розмірів» для Інституту механіки імені С. П. Тимошенка НАН України [24–26]. Задача зводиться до розв'язування часткової узагальненої алгебраїчної проблеми власних значень для розріджених матриць, що була розв'язана новими гібридними алгоритмами методу ітерацій на підпросторі [24, 25]. Обчислені мінімальні власні значення дають можливість визначити величини критичних параметрів стійкості шарувато-композитного матеріалу при стисненні поверхневим навантаженням.

У результаті розв'язування вказаних задач за допомогою створених високопродуктивних алгоритмічно-програмних засобів, отримано прискорення до 60–80 раз у порівнянні з результатами розв'язання традиційними програмними засобами на однопроцесорних комп'ютерах.

Висновки

Запропоновано інтелектуальну систему комп'ютерної математики для дослідження та розв'язування задач основних класів обчислювальної математики з такими функціональними можливостями:

- постановка задач обчислювальної математики на мові предметної області;
- звільнення користувачів від роботи по дослідженню математичних властивостей задач з наближеними даними, створенню відповідних гібридних алгоритмів та програм, аналізу достовірності результатів, що суттєво підвищує ефективність математичного моделювання фізико-технічних процесів;
- інноваційні способи ідентифікації портрету розріджених матриць на основі нейромереж, регуляризації різних структур розріджених даних до стандартних видів для ефективного розв'язування задач;
- підвищення точності комп'ютерних розв'язків задач з наближеними даними, використовуючи багаторозрядну арифметику;
- автоматизація всіх процесів розпаралелення на гібридному комп'ютері при ефективному використанні комп'ютерних ресурсів;
- візуалізація та пояснення результатів розв'язування.

Застосування інтелектуальної системи InparSolver та її складових у математичному моделюванні прикладних додатків, що зводяться до розв'язування задач обчислювальної математики на гібридних комп'ютерах, дає можливість істотно покращити результати моделювання, скоротити час на його реалізацію і, відповідно, заощадити кошти на проведення високовартісних натурних експериментів.

Забезпечується розв'язування прикладних задач надвеликої розмірності (до десятків млн. ступенів свободи) і отримання чисельних результатів з більшою достовірністю, завдяки застосуванню підвищеної розрядності для погано обумовлених та вироджених задач, в межах комп'ютерної розрядності.

Література

1. Сергієнко І.В., Хіміч О.М. (2019) *Математичне моделювання: Від мелм до екзафлопсів.* Вісник НАН України, № 8, 37–50.
2. Чизов Д.А. (2017) *Анализ тенденций и перспективных направлений развития суперЭВМ.* Проблемы национальной стратегии, № 6 (45), 145–161.
3. Воеводин В.В., Воеводин Вл.В. (2002) *Параллельные вычисления.* СПб.: БХВ-Петербург, с. 608.
4. Kleppe A. (2002*) Software Language Engineering: Creating Domain_Specific Language Using Metamodels.* N.Y.: Addison-Wesley Professional, p. 240.
5. Сергиенко И.В., Молчанов И.Н., Химич А.Н. (2010) *Интеллектуальные технологии высокопроизводительных вичислений.* Кибернетика и системный анализ, № 5, 164–176.
6. Dongarra J, Beckman P. and et al. (2011) *The International Exascale Software Project Roadmap.* International Journal of High Performance Computing Applications, 25(1), 3–60.
7. Ильин В.П. (2016) *Фундаментальные вопросы математического моделирования.* Вестник Российской академии наук, 86(4), 316–326.
8. Химич А.Н., Молчанов И.Н, Мова В.И. и др. (2007) *Численное программное обеспечение MIMD–компьютера Инпарком.* Киев: Наукова думка, 222 с.
9. Ильин В.П. (2014) *О некоторых проблемах «облачного» математического моделирования* Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия вычислительная математика и информатика, 3(1), 68–79.
10. Химич А.Н., Молчанов И.Н., Попов А.В., Чистякова Т.В., Яковлев М.Ф. (2008) *Параллельные алгоритмы решения задач вычислительной математики.* Киев: Наукова думка, 247 с.
11. Тарнавский Г.А., А.В. Алиев А.В. (2007) *Математичеокое моделирование: Основные сегменты, их особенности и проблемы.* Вычислительные методы и программирование. Т. 8, 297–310.
12. Wilkinson J.H. (1963) *Rounding Errors in Algebraic Processes.* London: H.W. Staat. Off. 161 p.
13. Воеводин В.В. (1969) *Ошибки округлений и устойчивость в прямых методах линейной алгебры.* М.: Изд. ВЦ МГУ, 153 с.
14. Дьяконов В.П. (2001) *Компьютерная математика. Теория и практика.* М.: Нолидж, 1296 с.
15. Горбаченко В.И. (2011) *Вычислительная линейная алгебра с примерами на MATLAB.* СПб.: БХВ-Петербург, (Учебное пособие), 320 с.
16. Хіміч О.М., Баранов А.Ю. (2013) *Гібридний алгоритм розв'язування лінійних систем із стрічковими матрицями прямими методами.* Компьютерная математика, № 2, 80−87.
17. Хіміч О.М., Сидорук В.А. (2016) *Дрібно-плитковий гібридний алгоритм факторизації розрідженої матриці.* Матеріали Всеукраїнської науково-практичної конференції за міжнародною участю «Інформатика та системні науки (ІСН-2016), м. Полтава, 19−21 березня 2016 р., 326–328.
18. Хіміч. О.М., Сидорук В.А. (2013) *Гібридний алгоритм розв'язування систем лінійних рівнянь з розрідженими матрицями методом верхньої релаксації.* Математичне та комп'ютерне моделювання. Серія: Фізико-математичні науки: зб. наук. праць. Кам'янець-Подільський національний університет ім. Івана Огієнка, вип. 9, 105–111.
19. Сидорук В.А. (2015) *Гібридний алгоритм розв'язування лінійних систем з розрідженими матрицями попеременно трикутним методом.* Комп'ютерна математика, вип. 2, 115–123.
20. Сидорук В.А., Єршов П.С., Богурський Д.О., Марочканич О.Р. (2019) *Інтелектуалізація обчислень для задач математичного моделювання складних процесів і об'єктів*. Комп'ютерна математика, № 1, 143–150.
21. Nikolaevskaja E.A., Chimich A.N, Chistyakova T.V. (2012) *Programming with Multiple Precision*. Berlin: Heidelberg. Springer-Verlag. Studies in Computational Intelligence, vol. 397, p. 233.
22. Чистякова Т.В., Єршов П.С. (2019) *Про вибір розрядності обчислень в інтелектуальній системі обробки матриць*. Математичне та комп'ютерне моделювання. Серія: Фізико-математичні науки. Зб. наук. праць., вип. 19, 193–198.
23. Velikoivanenko E.A., Milenin A.S., Popov A.V., Sidoruk V.A., Khimich A.N. (2019) *Methods of Numerical Forecasting of Serviceability of Welded Structures on Computers of Hybrid Architecture* // Cybernetics and Systems Analysis, Vol. 53, No. 1, January, 2019. 117–127.
24. A.N. Khimich, A.V. Popov, O.V. Chistyakov. (2017) *Hybrid Algorithms for Solving the Algebraic Eigenvalue Problem with Sparse Matrices.* Cybernetics and Systems Analysis. 2017, 53(6), 937–949.
25. Химич А.Н., Попов А.В., Сидорук В.А., Чистяков А.В. (2020) *Параллельный алгоритм решения частичной проблемы собственных значений для блочно-диагональных матриц с окаймлением.* Кибернетика і системний аналіз, № 6, 61–74.

26. A.N. Khimich V.A. Dekret, A.V. Popov, O.V. Chistyakov. (2018) *Numerical Study of the Stability of Composite Materials on Computers of Hybrid Architecture.* Journal of Automation and Information Sciences 50 (7). Begell House Inc.: 2018.

References

1. Serhiyenko I.V., Khimich O.M. (2019) *Matematychne modeliuvannia: Vid melm do ekzaflopsiv [Mathematical modelling: From melms to exaflops]*. Visnyk NAN Ukrainy, 8, 37–50. [in Ukrainian].
2. Chizov D.A. (2017). *Analiz tendenciy i perspektyvnyh napravleniy razvitiya superEVM [Analysis of tendencies and perspective directions of supercomputers development]*. Problemy natsionalnoy strategii, 6 (45), 145–161. [in Russian].
3. Voevodin V.V., Voevodin Vl.V. (2002) *Parallelnye vychisleniia [Parallel computations]*. SPb.: BHV – Peterburg., 608 p [in Russian].
4. Kleppe A. (2008) *Software Language Engineering: Creating Domain_Specific Language Using Metamodels.* N.Y.: Addison-Wesley Professional, 240.
5. Serhiienko V.V., Molchanov I.N., Khimich A.N. (2010) *Intellektualnye tehnologii vysokoproizvoditelnyh vychisleniy [Intellectual technologies of high performance computation]*. Kibernetyka is systemniy analiz, 5, 164–176. [in Russian].
6. Dongarra J, Beckman P. and et al. (2011) *The International Exascale Software Project Roadmap.* International Journal of High Performance Computing Applications., Vol. 25, Issue 1, 3–60.
7. Ilin V.P. (2016) *Fundamentalniye voprosy matematicheskogo modelirovaniya [Fundamental questions of mathematical modelling]*. Vestnik Rossiyskoy akademii nauk., 86, № 4, 316–326. [in Russian].
8. Khimich A.N., Molchanov I.N., Mova I.N., Mova V.I. et al. (2007) *Chislennoe programmnoe obespechenie MIMD-kompiutera Inparkom [Numerical software of MIMD computer Inparcom]*. Kiev: Naukova dumka, p. 222 [in Russian].
9. Ilin V.P. (2014) *O nekotoryh problemah "oblachnogo" matematicheskogo modelirovaniya [Some problems of cloud mathematical modelling]*. Vestnik Yuzhno-Uralskogo gosudarstvennogo universiteta Seriia vychislitelnaia matematika i informatika, vol. 3, № 1, 68–79. [in Russian].
10. Khimich A.N., Molchanov I.N., Popov A.V., Chistyakova T.V., Yakovlev M.F. (2008) *Parallelnye algoritmy resheniia zadach vychislitelnoi matematiki [Parallel algorithms for solving problems of computational mathematics]*. Kyiv: Naukova dumka., p. 247 [in Russian].
11. Tarnavskiy G.A., Aliev A.V. (2007). *Matematichekoe modelirovanie: Osnovnye segmenty ikh osobennosti i problemy [Mathematical modeling: The main segments, their features and problems]*. Vychislitelnye metody i programmirovanie., vol. 8., 297–310. [in Russian].
12. Wilkinson J.H. (1963) *Rounding Errors in Algebraic Processes*. – London: H.W. Staat. Off. p. 161.
13. Voevodin V.V. (1969). *Oshibki okruglenii i ustoichivost v priamykh metodakh lineinoi algebry [Rounding errors and stability in direct methods of linear algebra]*.– M.: Izd. VC MGU, p. 153 [in Russian].
14. Dyakonov V.P. (2001) *Kompiuternaia matematika Teoriia i praktika [Computer mathematics. Theory and practice]*. M.: Nolidzh. p. 1296. [in Russian].
15. Gorbachenko V.I. (2011) *Vychislitelnaia lineinaia algebra s primerami na MATLAB [Computational linear algebra with MATLAB examples]*. – SPb.: BHV-Peterburg, (Tutorial). p. 320 [in Russian].
16. Khimich O.M., Baranov A.Y. (2013) *Hibrydnyi alhorytm rozviazuvannia liniinykh system iz strichkovymy matrytsiamy priamymy metodamy [Hybrid algorithm for solving linear systems with tape matrices by direct methods]*. Kompiuternaia matematika, 2, 80−87. [in Ukrainian].
17. Khimich O.M., Sydoruk V.A. (2016) Hibrydnyi alhorytm rozviazuvannia liniinykh system iz strichkovymy matrytsiamy priamymy metodamy [Fine-tile hybrid algorithm for factorization of a sparse matrix]. *Materialy Vseukrainskoi naukovo-praktychnoi konferentsii za mizhnarodnoiu uchastiu «Informatyka ta systemni nauky (ISN-2016), 19−21 bereznia 2016 r., m. Poltava*, 326–328. [in Ukrainian].
18. Khimich O.M., Sydoruk V.A. (2013) *Hibrydnyi alhorytm rozviazuvannia system liniinykh rivnian z rozridzhenymy matrytsiamy metodom verkhnoi relaksatsii [Hybrid algorithm for solving systems of linear equations with sparse matrices by the method of upper relaxation]*. Mathematical and computer modelling. Series: Physical and Mathematical Sciences: Coll. Science. works. Ivan Ogienko Kamyanets-Podilsky National University, 9, 105–111. [in Ukrainian].
19. Sydoruk V.A. (2015) *Hibrydnyi alhorytm rozviazuvannia liniinykh system z rozridzhenymy matrytsiamy popereminno trykutnym metodom [A hybrid algorithm for solving linear systems with sparse matrices alternately by the triangular method]* Kompiuterna matematyka, 2, 115–123. [in Ukrainian].

20. Sydoruk V.A., Yershov P.S., Bohurskii D.O., Marochkanych O.R. (2019) *Intelektualizatsiia obchyslen dlia zadach matematychnoho modeliuvannia skladnykh protsesiv i obiektiv [Intellectualization of computations for mathematical modeling of complex processes and objects]*. Kompiuterna matematyka, 1, 143–150. [in Ukrainian].
21. Nikolaevskaja E.A., Chimich A.N, Chistyakova T.V. (2012) *Programming with Multiple Precision.* Springer-Verlag. Studies in Computational Intelligence, vol. 397, p. 233, Berlin, Heidelberg, 2012.
22. Chistyakova T.V., Yershov P.S. (2019) *Pro vybir rozriadnosti obchyslen v intelektualnii systemi obrobky matryts [The choice of bit rate of calculations in the intellectual matrix processing system]*. Matematychne ta Komputerne Modeliuvannia [Mathematical and computer modeling] Series: Physical and Mathematical Sciences. Coll. Science. works, 19, 193–198. [in Ukrainian].
23. Velikoivanenko E.A., Milenin A.S., Popov A.V., Sidoruk V.A., Khimich A.N. (2019) *Methods of Numerical Forecasting of Serviceability of Welded Structures on Computers of Hybrid Architecture*. Cybernetics and Systems Analysis, Vol. 53, No. 1, January, 2019, 117–127.
24. A.N. Khimich, A.V. Popov, O.V. Chistyakov. (2017) *Hybrid Algorithms for Solving the Algebraic Eigenvalue Problem with Sparse Matrices.* Cybernetics and Systems Analysis., Vol. 53, 6, 937–949.
25. Khimich A.N., Popov A.V., Sydoruk V.A., Chistyakov A.V. (2020) *Parallelnyi algoritm resheniia chastichnoi problemy sobstvennykh znachenii dlia blochno-diagonalnykh matrits s okaimleniem [Parallel algorithm for solving the partial problem of eigenvalues for block-diagonal matrices with a border]*. Кибернетика і системний аналіз Cybernetics and systems analysis, 6, 61–74. [in Ukrainian].
26. A.N. Khimich V.A. Dekret, A.V. Popov, O.V. Chistyakov. (2018) *Numerical Study of the Stability of Composite Materials on Computers of Hybrid Architecture*. Journal of Automation and Information Sciences 50 (7). Begell House Inc.

Стаття надійшла до редакції 19.10.2020
Після доробки 30.11.2020